



TITLE:

非圧縮性流体中の球形Brown粒子 の非線形Langevin方程式(非線型・ 非平衡状態の統計力学,研究会報告)

AUTHOR(S):

金田, 行雄

CITATION:

金田, 行雄. 非圧縮性流体中の球形Brown粒子の非線形Langevin方程式
(非線型・非平衡状態の統計力学,研究会報告). 物性研究 1981, 35(6):
F16-F18

ISSUE DATE:

1981-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90208>

RIGHT:

非圧縮性流体中の球形 Brown 粒子の 非線形 Langevin 方程式

名大・工 金 田 行 雄

流体中の Brown 粒子の運動に対して次のような線形 Langevin 方程式

$$M \frac{d}{dt} U_i(t) = - \int_{-\infty}^t r_{ij}(t-s) U_j(s) ds + f_i(t) + f_i^{\text{ext}}(t), \quad (1)$$

がよく用いられる。ここで M, \mathbf{U} は各々粒子の質量と速度, \mathbf{f}^{ext} は外場による力, j についての和の記号は略してあり, 粒子の回転の効果は無視できるとしてある。ところで粒子の速度, より正確にはレイノルズ数 Re , が充分小さくはないとき, 当然(1)のような線形の式あるいは線形応答理論における r_{ij} と \mathbf{f} とを関係づける揺動散逸定理はそのままの形では成立しないと予想される。では, その場合粒子の運動, ひいてはそれの誘起するまわりの流体の運動は粒子に働く力とくにランダム力((1)の \mathbf{f} に対応)にどのように影響し, どのような非線形 Langevin 方程式に導くであろうか。ここでは粒子の運動がほぼ定常とみなすことができ, Re が小さいただし無限小ではない球形粒子の場合のその影響について Landau & Lifshitz による流体力学的ゆらぎの理論に基づいて考える。ここで用いるような半流体力学的方法はとくに抵抗係数やランダム力の相関を具体的に求めるのに便利である。

さて, 粘性率 μ , 密度 ρ の非圧縮粘性流体中を速度 \mathbf{U} , 回転 $\mathbf{\Omega}$ で運動している半径 a の球形粒子を考えよう。球の中心を原点とする座標系で, 流体の速度 \mathbf{v} と圧力 p は次の Landau & Lifshitz による式

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} v_i + v_j v_{i,j} \right) = -p_{,i} + \mu \Delta v_i + \sigma_{ij,j}, \quad \text{div } \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

と境界条件: $\mathbf{v} = \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}$ ($r = a$ で), $\langle \mathbf{v} \rangle \rightarrow -\mathbf{U}$ ($r \rightarrow \infty$ で), を満たすと仮定する。ここで σ_{ij} は流体の熱揺動に起因するランダムなストレステンソルで

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = 0, \quad \langle \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) \sigma_{km}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2kT\mu C_{ijkm} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (3)$$

を満たし, $C_{ijkm} = (\delta_{ik}\delta_{jm} + \delta_{im}\delta_{jk} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\delta_{km})$, T は一様な温度, $\langle \rangle$ はアンサンブル平均を表わす。今, \mathbf{v}, p を $\mathbf{v} = \bar{\mathbf{V}} + \bar{\mathbf{v}}, p = \bar{P} + \tilde{p}$ と分解し $(\bar{\mathbf{V}}, \bar{P})$ を

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \bar{V}_i + \bar{V}_j \bar{V}_{i,j} \right) = -\bar{P}_{,i} + \mu \Delta \bar{V}_i, \quad \text{div } \bar{\mathbf{V}} = 0, \quad (4)$$

$$\bar{\mathbf{V}} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} \quad (r = a \text{ で}), \quad \bar{\mathbf{V}} \rightarrow -\mathbf{U} \quad (r \rightarrow \infty \text{ で})$$

を満たす場と定義すると $(\bar{\mathbf{v}}, \tilde{\mathbf{p}})$ は

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{v}_i + \bar{V}_j \tilde{v}_{i,j} + \tilde{v}_j \bar{V}_{i,j} \right) + \tilde{p}_{,i} - \mu \Delta \tilde{v}_i - \sigma_{ij,j} = -\rho \tilde{v}_j \tilde{v}_{i,j}, \quad (5)$$

及び $\text{div} \tilde{\mathbf{v}} = 0$, $\tilde{\mathbf{v}} = 0$ ($r = a$ で), $\langle \tilde{\mathbf{v}} \rangle \rightarrow 0$ ($r \rightarrow \infty$ で) を満たすことがわかる。粒子に働く力 \mathbf{F}^0 ((1)の右辺に対応) 及び原点のまわりのトルク \mathbf{F}^1 は一般に

$$\mathbf{F}^\alpha = \bar{\mathbf{F}}^\alpha + \mathbf{f}^\alpha + \mathbf{f}^{\alpha, \text{ext}}, \quad (\alpha = 0 \text{ or } 1), \quad (6)$$

の形に表わされる。ここで $\bar{\mathbf{F}}^\alpha$ は $(\bar{\mathbf{V}}, \bar{P})$, \mathbf{f}^α は $(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\mathbf{p}}, \sigma_{ij})$, $\mathbf{f}^{\alpha, \text{ext}}$ は外場による力あるいはトルクである。

以下、二つの仮定[A] “ \mathbf{U} , $\boldsymbol{\Omega}$ あるいは $\bar{\mathbf{V}}$ の時間依存性は無視できる,” および[B] “(5)の $\tilde{\mathbf{v}}$ についての二次の項すなわち右辺は無視できる” が成り立つ場合を考える。また, (3)は \mathbf{U} , $\boldsymbol{\Omega}$ と独立に成り立つとし, 以下 $\langle \rangle$ を \mathbf{U} , $\boldsymbol{\Omega}$ を与えられたとしての条件つき平均の意味で用いる。これらの仮定の下に $\langle (5) \times \sigma_{mn} \rangle$, $\langle (5) \times f_m^\alpha \rangle$ を作り, それらを解くことによって相関 $\langle f_m^\alpha(t) f_n^\beta(0) \rangle \equiv \Phi_{mn}^{\alpha\beta}(t)$ を, 少なくとも原則的には求めることができる。なお, ここで明らかに $\langle f_m^\alpha(t) \rangle = 0$ であり, $(\bar{\mathbf{V}}, \bar{P})$ による $\bar{\mathbf{F}}^\alpha$ は(4)から求まる。球の定常運動に対しては良く知られているように

$$\bar{\mathbf{F}}^0 = -6\pi a \mu \left(1 + \frac{3}{8} Re \right) \mathbf{U} + \pi a^3 \rho \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{U} + o(a \mu U Re), \quad (Re \equiv \rho a U / \mu), \quad (7)$$

である。(ここ及びこれ以降 $a \boldsymbol{\Omega} = O(U)$ とする。)

$\Phi_{mn}^{\alpha\beta}$ の実際の解析には時間に関するフーリエ変換 ($\hat{\phi}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \phi(t) dt$) を用いるのが便利である。すべての ω の値に対して $\hat{\Phi}(\omega)$ を求めるのはそう易しくはない。ここでは (I) $\omega = 0$, (II) $\omega^* \equiv \omega \times (\rho a^2 / \mu) \geq O(1)$ の二つの場合に議論を限ることにする。なお, 計算の詳細文献等は他の機会 (投稿準備中) に譲り主な点のみを記しておく。

(I) $\omega = 0$ の場合;

近似の空間的非一様性を考慮した特異摂動法が必要である。たとえば, $\hat{\mathbf{v}}^{m\alpha}(\omega)$ を $\langle \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) f_m^\alpha(0) \rangle$ のフーリエ変換とすると, $\hat{\mathbf{v}}^{m\alpha}(0) = (\hat{\mathbf{v}}^0)^{m\alpha} + Re(\hat{\mathbf{v}}^1)^{m\alpha} + \dots$ の形の全空間 (\mathbf{r} - 空間) で正当な解を仮定するのは適切でない。計算の結果

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_{mn}^{\alpha\beta}(0) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \langle f_m^\alpha(t) f_n^\beta(0) \rangle dt \\ &\begin{cases} = 2kT \cdot 6\pi a \mu \left\{ \left[\delta_{mn} + \frac{3}{16} Re \left(3\delta_{mn} - \frac{U_m U_n}{U^2} \right) \right] \delta_{\alpha\beta} + o(Re) \right\}, & (\alpha = 0), \\ = 2kT \cdot 8\pi a^3 \mu \left\{ \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} + o(Re) \right\}, & (\alpha = 1), \end{cases} \quad (8) \end{aligned}$$

が得られる。 Re を 0 とおくとこれはもちろん $Re = 0$ の場合の良く知られた結果に一致する。座標軸と m, n を適当にとれば(7)で現われた $6\pi a\mu (1 + \frac{3}{8} Re)$ の因子が(8)でも現われることに注意されたい。

(II) $\omega^* \geq O(1)$ の場合;

特異摂動法は不要である。 $\hat{\phi}_{mn}^{\alpha\beta}(\omega)$ は

$$\hat{\phi}(\omega) = (\hat{\phi}^0)(\omega) + o(Re), \quad (9)$$

の形となる。ここで $(\hat{\phi}^0)$ は Re の 0 次の ((5)で \bar{V} を 0 として得られる) 項である。(8)と違って(9)では Re の 1 次の項は 0 である。

なお上記の議論を球以外の粒子に一般化することは、 V の定常性を仮定できる限り難しくない。

Maxwell-Langevin 方程式と久保公式

お茶の水大・理 橋瓜夏樹・柴田文明

H.A. ローレンツ以来、電磁場の微視的方程式からマクロな方程式を導出しようという試みは多い。たとえば、L. ローゼンフェルトの本などが典型的なまとめとなっている。以上は平均量としての電磁場のふるまいに関してであるが、揺動力を伴った電磁場の話はランダウ・リフシッツが現象論的に行った。そこでは揺動散逸定理が仮定されている。すると第一の問題は、揺動を含む電磁場の基礎方程式(標題のM-L方程式)をどのようにしてミクロに導き出し得るのかということになる。その際摂動散逸定理はどうなっているのであろう。

ところで久保による線形応答理論は電磁場と物理量の平均値との間に橋渡しをして、所謂構成方程式を与えている。ここでは電磁場は与えられた c-数として扱われている。かつて Y. Toyozawa が量子化された場における久保公式の妥当性を問われた事があった。これが第二の問題。

以上の二つの問題を、電磁場とそれと相互作用している物質系の双方を量子系としてとり扱い解決しようというのが目的である。方法論は我々が以前に展開した量子論的なブラウン運動の基礎方程式を用いる。Minimalな相互作用を入れたハミルトニアンから出発して写影演算子の方法によって物質系の自由度を消去して行く。